

УДК 539.186

ОПИСАНИЕ ЗАРЯДОВО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ БЫСТРЫХ ИОНОВ

© 2019 г. Н. В. Новиков^{1, *}, Я. А. Теплова^{1, **}

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына,
119991 Москва, Россия

*E-mail: nvnovikov65@mail.ru

**E-mail: sonatina1929@mail.ru

Поступила в редакцию 28.06.2018 г.

После доработки 28.06.2018 г.

Принята к публикации 28.06.2018 г.

Предложена теоретическая модель, описывающая эволюцию зарядово-энергетического распределения ионов, проходящих через мишень, как процесс Маркова, в котором вероятность переходов между элементами фазового пространства пропорциональна сечениям неупругих столкновений и соответствующим потерям энергии ионов. Учет корреляций процессов перезарядки ионов и ионизации атомов мишени позволяет описать не только влияние энергетического распределения ионов на процесс установления равновесного зарядового распределения, но и на изменение средней энергии ионов, когда распределение по зарядам неравновесное.

Ключевые слова: средний заряд, ширина зарядового распределения ионов, потери энергии ионов в неупругих столкновениях (неупругие потери энергии), средняя энергия ионов.

DOI: 10.1134/S0207352819040139

ВВЕДЕНИЕ

Экспериментально обнаружено, что потери энергии ионов зависят от их заряда [1–6]. Ионы с большим зарядом замедляются быстрее из-за более активного взаимодействия с атомами мишени. Объясняется этот эффект возрастанием сечений неупругих взаимодействий ионов и атомов мишени при увеличении заряда ионов. Кроме того, взаимосвязь распределений ионов по зарядам и энергии проявляется в том, что от величины заряда зависит разброс потерь энергии [7]. Принято различать разброс потерь энергии, связанный с флуктуациями заряда ионов вследствие потери и захвата электронов, и разброс потерь энергии без этих флуктуаций, когда ионы рассматривают как бесструктурные частицы с эффективным зарядом [8].

Современные теоретические модели описывают потери энергии ионов, проходящих через вещество, с помощью равновесного распределения ионов по зарядам [9–11]. В этом случае для описания распределения ионов в пучке сначала определяют энергию ионов и только потом зарядовые фракции [11] и средний заряд ионов [10, 11]. Для описания неравновесных зарядовых распределений ионов в зависимости от толщины мишени необходимы значения сечений потери и захвата электронов [12]. Раньше потери энергии ионов в таком процессе не вычислялись, а учитывались в виде

поправочных множителей. Таким образом, зарядовые и энергетические распределения в современных теоретических моделях рассматривают независимо друг от друга. Отчасти это связано с тем, что потери энергии быстрых ионов в твердых мишенях измеряли в диапазоне значений энергии и толщин мишени, которые соответствуют равновесному распределению ионов по зарядам. К тому же, методы расчета неупругих потерь энергии для ионов с неравновесным распределением по зарядам в настоящее время отсутствуют. Тем не менее, неравновесные зарядовые распределения ионов в поверхностных слоях мишени могут существенно влиять на распределения ионов по зарядам и энергии. Толщина мишени, необходимая для установления равновесного зарядового распределения, увеличивается в случае тяжелых ионов по сравнению с легкими и может быть сравнима с пробегом [13]. Этот эффект проявляется наиболее сильно, когда заряды падающих на мишень ионов значительно отличаются от равновесного заряда ионов с той же энергией. Потери энергии ионов при неравновесном и равновесном распределении по зарядам различаются, и требуется уточнение теоретических моделей для их описания.

Цель настоящей работы – предложить теоретическую модель, которая учитывает корреляцию зарядового распределения ионов и потерь энер-

гии, и разработать метод расчета зарядово-энергетического распределения ионов в газах и твердых мишенях.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ ПО ЗАРЯДАМ И ЭНЕРГИИ

Зарядово-энергетическое распределение ионов, падающих на мишень с зарядом q_0 и энергией E_0 и прошедших слой вещества толщиной x , характеризуется величиной $G_q(x, E_j)$, которая равна относительному количеству ионов с зарядом q и энергией E_j в диапазоне значений энергии $E_j \pm \delta E_j$. Если толщина мишени x меньше пробега ионов, то выполняется условие сохранения количества ионов:

$$\sum_{q,j} G_q(x, E_j) = 1. \quad (1)$$

Для описания эволюции зарядово-энергетического распределения ионов при изменении толщины мишени используется система дифференциальных уравнений перезарядки [14], модифицированная с учетом изменения энергии ионов:

$$\frac{dG_q}{dx} = \sum_{k \neq q} G_k(x, E_j) \sigma_{kq}(E_j, Z, Z_t) - G_q(x, E_j) \times \sum_{k \neq q} \sigma_{qk}(E_j, Z, Z_t), \quad (2)$$

$$-\frac{dE_j}{dx} = S_n(E_j, Z, Z_t) + S_e(E_j, Z, Z_t, q) \quad (3)$$

и с начальным условием

$$G_{q0}(0, E_0) = 1, \quad (4)$$

где Z – заряд ядра иона, Z_t – заряд ядра атома мишени, $\sigma_{q,k}(E, Z, Z_t)$ – сечения потери и захвата электронов (нижние индексы соответствуют зарядам ионов до и после столкновения с атомом мишени), $S_n(E, Z, Z_t)$ – упругие потери энергии ионов [9], $S_e(E, Z, Z_t, q)$ – неупругие потери энергии ионов с зарядом q .

Зарядовые фракции ионов $\Phi_q(x)$ вычисляются в ходе суммирования по всем ионам с энергией $E_j \pm \delta E_j$:

$$\Phi_q(x) = \sum_j G_q(x, E_j). \quad (6)$$

Распределение ионов по зарядам характеризуется средним зарядом

$$\bar{Q}(x) = \sum_{q,j} q G_q(x, E_j) = \sum_q q \Phi_q(x) \quad (7)$$

и параметром ширины распределения по зарядам

$$[D(x)]^2 = \sum_{q,j} [q - \bar{Q}(x)]^2 G_q(x, E_j). \quad (8)$$

Распределение ионов по энергии E после прохождения мишени толщиной x получали в ходе суммирования по зарядам ионов:

$$H(x, E_j) = \sum_q G_q(x, E_j). \quad (9)$$

Оно характеризовалось средней энергией

$$\bar{E}(x) = \sum_{q,j} E_j G_q(x, E_j) = E_j H(x, E_j). \quad (10)$$

Разброс значений средней энергии ионов за счет изменения их зарядово-энергетического распределения описывается соотношением:

$$[\Delta(x)]^2 = \sum_{q,j} [E_j - \bar{E}(x)]^2 G_q(x, E_j). \quad (11)$$

Для “тонкой” мишени, когда ион теряет незначительную часть своей энергии, распределение по энергии вырожденное:

$$G_q(x, E) = \Phi_q(x) \delta(E - E_0). \quad (12)$$

Тогда система дифференциальных уравнений (2) и (3) преобразуется в систему уравнений перезарядки [14]:

$$\frac{d\Phi_q}{dx} = \sum_{k \neq q} \Phi_k(x) \sigma_{kq}(E_0, Z, Z_t) - \Phi_q(x) \times \sum_{k \neq q} \sigma_{qk}(E_0, Z, Z_t), \quad (13)$$

с начальным условием

$$\Phi_{q0}(0) = 1. \quad (14)$$

Когда толщина мишени увеличивается, устанавливается равновесное распределение, в котором относительное количество ионов $F_q(\bar{E})$ с зарядом q и энергией $\bar{E}(x)$ можно вычислить с помощью решения системы однородных уравнений

$$\sum_{k \neq q} F_k(\bar{E}) \sigma_{kq}(\bar{E}, Z, Z_t) - F_q(\bar{E}) \sum_{k \neq q} \sigma_{qk}(\bar{E}, Z, Z_t) = 0 \quad (15)$$

при условии нормировки

$$\sum_q F_q(\bar{E}) = 1. \quad (16)$$

Для описания равновесного распределения ионов по зарядам используются параметры среднего заряда

$$\bar{q}(\bar{E}) = \sum_q q F_q(\bar{E}) \quad (17)$$

и ширины равновесного зарядового распределения

$$[d(\bar{E})]^2 = \sum_q [q - \bar{q}(\bar{E})]^2 F_q(\bar{E}). \quad (18)$$

При увеличении толщины мишени x средняя энергия \bar{E} ионов, прошедших мишень, уменьшается. Это приводит к изменению сечений (15), зарядовых фракций $F_q(\bar{E})$ и параметров $\bar{q}(\bar{E})$ и $d(\bar{E})$. Критерием определения толщины мишени, необходимой для установления равновесного зарядового распределения ионов, является малая разность параметров, соответствующих решениям систем уравнений (2), (3) и (15):

$$\left| \bar{Q}(T) - \bar{q}(\bar{E}) \right| / \bar{q}(\bar{E}) = \delta, \quad \left| D(T) - d(\bar{E}) \right| / d(\bar{E}) = \delta \quad (19)$$

при $x \geq T$,

где T – толщина мишени, необходимая для установления равновесного распределения ионов по зарядам [15], а значение параметра δ не превышает несколько процентов. Эволюцию зарядового и энергетического распределения ионов в среде можно разделить на две области. При небольшой толщине мишени ($x < T$) зарядовое распределение ионов неравновесное, и $G_q(x, E)$ зависит от разности зарядов $q_0 - \bar{q}(E_0)$. Уменьшение энергии ионов с зарядом $q_0 \neq \bar{q}(E_0)$ при $x = T$ может быть значительным ($\bar{E} < E_0$). В этом случае для описания распределения ионов по зарядам и энергии необходимо в уравнении (2) учитывать зависимость сечений $\sigma_{q,k}(E, Z, Z_t)$ от энергии ионов, а потери энергии ионов – от q (3). При толщине мишени $x > T$ распределение ионов по зарядам равновесное, $\Phi_q(x) \rightarrow F_q(\bar{E})$, а потери энергии ионов $S_e(E, Z, Z_t, q)$ можно описать в приближении $S_e(E, Z, Z_t, q) \approx S_e(\bar{E}, \bar{q}(\bar{E}))$ [9], когда ионы имеют одинаковый заряд $\bar{q}(\bar{E})$ и при прохождении слоя толщиной dx теряют одинаковую энергию.

СЕЧЕНИЯ ПЕРЕЗАРЯДКИ И ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ ИОНОВ ПРИ НЕУПРУГИХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

Описание сечений потери $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$ и захвата $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$ одного электрона ионами в различных газовых мишенях основано на экспериментальных данных [16, 17]:

$$\sigma_{q,q\pm 1}^{\text{gas}}(E, Z, Z_t), \quad Z_t = 1, 2, 7, 10, 18, 36, 54. \quad (20)$$

Для вычисления сечений потери и захвата электрона в твердой мишени $\sigma_{q,q\pm 1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$ использовали коэффициент $C_{g-s}(E, Z, Z_t) \geq 1$ [18, 19], на который умножали все сечения потери и делили все сечения захвата электрона в газах:

$$\sigma_{q,q+1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t) = \sigma_{q,q+1}^{\text{gas}}(E, Z, Z_t) C_{g-s}(E, Z, Z_t), \quad (21)$$

$$\sigma_{q,q-1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t) = \sigma_{q,q-1}^{\text{gas}}(E, Z, Z_t) / C_{g-s}(E, Z, Z_t). \quad (22)$$

В этом приближении сечения перезарядки ионов в твердой мишени отличались от сечений в газах только масштабным множителем $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$, который не зависел от заряда ионов q . С сечениями $\sigma_{q,q\pm 1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$ вычислялись равновесные зарядовые фракции $F_q(E)$ (15) и параметры $\bar{q}(E)$ (17) и $d(E)$ (18). Из соотношения $C_{g-s}(E, Z, Z_t) \geq 1$ следует, что средний заряд ионов в твердой мишени больше, чем в газах. Коэффициент $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ получали в результате нормировки среднего заряда $\bar{q}(E)$ на значение эмпирического среднего заряда $\bar{q}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$ [20]. При расчетах равновесного зарядового распределения с использованием сечений $\sigma_{q,q\pm 1}^{\text{gas}}(E, Z, Z_t)$ или $\sigma_{q,q\pm 1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$ ширина зарядового распределения $d(E)$ оказывается меньше экспериментальной, что демонстрирует необходимость учета потери и захвата нескольких электронов в одном столкновении.

Неупругие потери энергии ионов с зарядом q в процессах потери и захвата одного электрона можно записать в виде [21]:

$$S_{q+1}(E, Z, Z_t) = \rho \sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t) \left[E_e + \left| \varepsilon_{q+1}(Z) \right| \right], \quad (23)$$

$$S_{q-1}(E, Z, Z_t) = \rho \sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t) \left[E_e - \left| \varepsilon_{q-1}(Z) \right| \right], \quad (24)$$

где ρ – плотность мишени, E_e – кинетическая энергия электрона, имеющего скорость, равную скорости столкновения, $\varepsilon_q(Z)$ – энергия связи электрона в основном состоянии ионов с зарядом q и зарядом ядра Z . Отличие сечений $\sigma_{q,q\pm 1}^{\text{gas}}(E, Z, Z_t)$ и $\sigma_{q,q\pm 1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$ приводит к разнице потерь энергии $S_{q\pm 1}(E, Z, Z_t)$ в газообразных и твердых мишенях.

Для вычисления сечений потери и захвата двух электронов использовалась модель, в которой предполагалось, что отношение сечений в процессах потери и захвата нескольких электронов одинаковое и не зависит от заряда ионов:

$$W^{\text{gas}}(E, Z, Z_t) = \sigma_{q,q+2}^{\text{gas}}(E, Z, Z_t) / \sigma_{q,q+1}^{\text{gas}}(E, Z, Z_t) = \sigma_{q,q-2}^{\text{gas}}(E, Z, Z_t) / \sigma_{q,q-1}^{\text{gas}}(E, Z, Z_t) < 1, \quad (25)$$

$$W^{\text{sol}}(E, Z, Z_t) = \sigma_{q,q+2}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t) / \sigma_{q,q+1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t) = \sigma_{q,q-2}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t) / \sigma_{q,q-1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t) < 1. \quad (26)$$

С использованием сечения $\sigma_{q,q\pm 1}(E, Z, Z_t)$ и $\sigma_{q,q\pm 2}(E, Z, Z_t)$, вычисляются равновесные зарядовые фракции $F_q(E)$, а затем $\bar{q}(E)$ и $d(E)$. Средний заряд ионов $\bar{q}(E)$ при учете сечений $\sigma_{q,q\pm 2}(E, Z, Z_t)$ изменяется слабо, а величина пара-

метра $d(E)$ может измениться в 1.5–2 раза. Величины $W^{\text{gas}}(E, Z, Z_t)$ и $W^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$ получали в результате нормировки параметра $d(\bar{E})$ на значения эмпирических параметров в газах $d^{\text{gas}}(E, Z, Z_t)$ и в твердых мишенях $d^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$ [22]. Таким образом, учет влияния потери и захвата ионом двух электронов на зарядовое распределение ионов в приближении (25) и (26) сводится к одному множителю $W^{\text{gas}}(E, Z, Z_t)$ или $W^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$, который не зависит от заряда ионов q . Из неравенств (25) и (26) следует, что влияние процессов потери и захвата двух электронов на неупругие потери энергии ионов в первом приближении можно не учитывать.

Целесообразно сначала рассмотреть описание сечений ионизации атома мишени протонами в различных газах, которое основано на экспериментальных данных [23], а именно

$$\sigma_H^{\text{gas}}(E, Z_t), Z_t = 1, 2, 7, 8, 10, 18, 36. \quad (27)$$

Для протонов с энергией $E \geq 0.05$ МэВ сечения ионизации $\sigma_H^{\text{gas}}(E, Z_t)$ превышают сечения захвата протонами одного электрона $\sigma_{1,0}^{\text{gas}}(E, Z = 1, Z_t)$ более чем в 1.5–2 раза, а в области значений энергии $E \geq 0.15$ МэВ более чем на порядок величины [23]. Потери энергии протонов в газовых $S_H^{\text{gas}}(E, Z_t)$ и твердых $S_H^{\text{sol}}(E, Z_t)$ мишенях различаются мало [9]:

$$S_H^{\text{sol}}(E, Z_t) \approx S_H^{\text{gas}}(E, Z_t). \quad (28)$$

Следовательно, в отличие от сечений перезарядки $\sigma_{q,q'}(E, Z, Z_t)$ сечения ионизации атомов протонами в твердой и газообразной мишенях совпадают:

$$\sigma_H^{\text{sol}}(E, Z_t) \approx \sigma_H^{\text{gas}}(E, Z_t) \text{ при } E \geq 0.1 \text{ МэВ.} \quad (29)$$

Для описания сечения ионизации атома мишени многозарядными ионами используется приближение эффективного заряда. Считается, что сечения в столкновениях с многозарядными ионами и протонами отличаются друг от друга на множитель, пропорциональный среднему заряду ионов [24]:

$$\sigma_Z(E, Z, Z_t) = \sigma_H(E, Z_t) [\bar{q}(E)]^{p(E, Z, Z_t)}. \quad (30)$$

Безразмерный множитель $p(E, Z, Z_t) > 1$ характеризует влияние возбужденных состояний атома мишени при ионизации атома ионами с $Z \geq 2$. Атом мишени в результате взаимодействия с ионом может сначала перейти в одно из возбужденных состояний и только затем ионизируется. Из теории возмущений следует, что в пределе быстрых столкновений двухступенчатых переходов нет, $p(E, Z, Z_t) \rightarrow 2$ при $E \rightarrow \infty$ [24], и сечение ионизации

атома (30) описывается теорией возмущений в приближении первого порядка.

Из соотношения (30) следует, что неупругие потери энергии ионов с равновесным распределением по зарядам можно представить в виде суммы:

$$S_e(E, Z, Z_t) = S_H(E, Z_t) [\bar{q}(E)]^{p(E, Z, Z_t)} + \sum_q F_q(E) [S_{q+1}(E, Z, Z_t) + S_{q-1}(E, Z, Z_t)], \quad (31)$$

в которой учтены процессы ионизации атома мишени, а также потеря и захват ионом одного электрона. Величина $p(E, Z, Z_t)$ в газообразных и твердых мишенях [24] вычислялась с использованием потерь энергии $S_e(E, Z, Z_t)$ и $S_H(E, Z_t)$ [9], сечений $\sigma_{q,q\pm 1}(E, Z, Z_t)$ и результатов расчетов $F_q(E)$ (15) и $\bar{q}(E)$ (17). Такой способ расчета позволил получить сечения (30) и потери энергии ионов в процессе ионизации атома мишени многозарядными ионами с неравновесным зарядовым распределением:

$$S_q(E, Z, Z_t, x) = S_H(E, Z_t) \left[\sum_q \Phi_q(x) q \right]^{p(E, Z, Z_t)}. \quad (32)$$

МЕТОД РАСЧЕТА

При толщине мишени x зарядово-энергетическое распределение ионов $G_q(x, E)$ рассматривается как функция распределения плотности частиц в пространстве зарядов и энергии ионов. В области энергии, где процессы потери и захвата ионом двух электронов можно не учитывать ($W(E, Z, Z_t) \ll 1$), каждый элемент текущего фазового пространства $G_q(x, E_0)$ будет связан с тремя элементами в последующем распределении соотношениями:

$$G_q(x + dx, E_1) = G_q(0, E_0) \times \left\{ 1 - [\sigma_{q,q+1}(E_0, Z, Z_t) + \sigma_{q,q-1}(E_0, Z, Z_t)] dx \right\}, \quad (33)$$

где $E_1 = E_0 - [S_n(E_0) + S_q(E_0, Z, Z_t, x)] dx$;

$$G_{q+1}(x + dx, E_2) = G_q(x, E_0) \sigma_{q,q+1}(E_0, Z, Z_t) dx, \quad (34)$$

где $E_2 = E_0 - S_{q+1}(E_0, Z, Z_t) dx$;

$$G_{q-1}(x + dx, E_3) = G_q(x, E_0) \sigma_{q,q-1}(E_0, Z, Z_t) dx, \quad (35)$$

где $E_3 = E_0 - S_{q-1}(E_0, Z, Z_t) dx$. Для всех рассмотренных неупругих процессов уменьшение энергии пропорционально толщине мишени, а величина коэффициента пропорциональности связана с неупругими потерями энергии, которые зависят от заряда иона q .

На рис. 1 приведена схема изменения распределения ионов по зарядам и энергии в зависимо-

сти от толщины мишени для $x_0 < x_1 < x_2$. С увеличением толщины мишени средняя энергия ионов уменьшается $E_0 > \bar{E}(x_1) > \bar{E}(x_2)$, а в распределении ионов по зарядам появляются ионы с зарядами $q \pm 1$ при толщине мишени x_1 и $q \pm 2$ при толщине мишени x_2 . Когда $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t) > \sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$, при толщине мишени x_1 в зарядовом распределении ионов появляется асимметрия, и средний заряд ионов, проходящих через вещество, возрастает: $\bar{Q}(x_2) > \bar{Q}(x_1) > q$. Особенностью нового метода описания зарядово-энергетического распределения ионов является то, что это распределение в каждый последующий момент (при толщине мишени x_2) связано только с текущим распределением (при толщине мишени x_1) и в явном виде не зависит от распределения при $x < x_1$. По этому признаку (“будущее” зависит от “прошлого” только через “настоящее”) новый метод описания зарядово-энергетического распределения ионов относится к марковскому процессу, в котором вероятность перехода $(q, E) \rightarrow (q', E')$ пропорциональна сечениям неупругих столкновений и неупругим потерям энергии ионов. Отметим, что марковские процессы успешно использовались ранее, например, для решения транспортного уравнения, где за фазовый объем принимали координату и импульс частицы, а переменной являлось время. Для наглядности на рис. 1 представлена упрощенная схема, в которой не учитываются кратные процессы перезарядки, когда ион в одном столкновении может потерять или захватить несколько электронов. При выполнении расчетов процессы потери и захвата двух электронов $\sigma_{q,q\pm 2}(E, Z, Z_t)$ учитывали в соответствии с (2) и в систему уравнений (33)–(35) включали еще два дополнительных уравнения.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

В качестве примера использования предложенной модели на рис. 2 приведены результаты расчетов среднего заряда ионов Ar^{8+} и Ar^{18+} с энергией 4.3 МэВ/нуклон в углероде. Полученные результаты для $q_0 = 8$ качественно согласуются с экспериментальными данными при малой толщине мишени, когда распределение ионов по зарядам неравновесное и средний заряд ионов $\bar{Q}(E, x)$ зависит от q_0 . К сожалению, измерения при толщине мишени $x > 1.5$ мкм не проводились [25]. Результаты расчетов предсказывают уменьшение $\bar{Q}(E, x)$ при дальнейшем увеличении толщины мишени x , так как равновесное зарядовое распределение достигается при толщине мишени $x > 1.5$ мкм. Характер изменения среднего заряда ионов в поверхностных слоях мишени зависит от

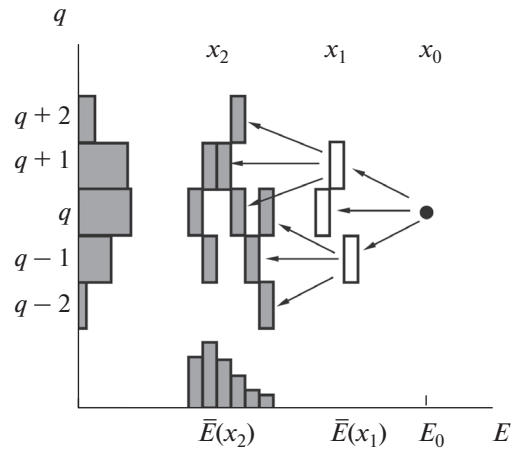


Рис. 1. Схема изменения распределения ионов по зарядам и энергии в зависимости от толщины мишени x для $x_0 < x_1 < x_2$. Белым и серым цветом выделены области энергии и зарядов ионов при толщине мишени x_1 и x_2 соответственно. Проекции зарядово-энергетического распределения на координатные оси в виде гистограмм демонстрируют распределение ионов по заряду q и энергии E при толщине мишени x_2 . Стрелками указаны некоторые из областей, связанные между собой соотношениями (33)–(35). На оси энергии указаны значения средней энергии ионов $E_0 > \bar{E}(x_1) > \bar{E}(x_2)$.

соотношения между начальным зарядом q_0 и величиной равновесного заряда ионов $\bar{q}(E_0)$ (рис. 2). Ионы с $q_0 > \bar{q}(E_0)$ захватывают электроны, и это приводит к уменьшению $\bar{Q}(E, x)$. Ионы с $q_0 < \bar{q}(E_0)$ теряют электроны, средний заряд ионов $\bar{Q}(E, x)$ увеличивается, что соответствует экспериментальным данным. С увеличением толщины мишени отличие $\bar{Q}(E, x)$ от $\bar{q}(E)$ уменьшается, и при толщине мишени $x \sim 3.5$ мкм выполняется соотношение $\bar{Q}(E, x) \approx \bar{q}(E)$. Ионы, у которых средний заряд $\bar{Q}(E, x)$ возрастает ($q_0 < \bar{q}(E_0)$), достигают $\bar{q}(E)$ при меньшей толщине мишени, чем ионы, у которых средний заряд $\bar{Q}(E, x)$ уменьшается ($q_0 > \bar{q}(E_0)$). Влияние потерь энергии ионов (3) на их зарядовое распределение приводит к уменьшению $\bar{q}(E)$ с увеличением толщины мишени при больших x .

На рис. 3 приведены результаты расчетов ширины зарядового распределения ионов аргона в углеродной мишени. В падающем на мишень пучке находятся ионы только с зарядом q_0 , и $D(E, x = 0) = 0$. При увеличении толщины мишени в зарядовом распределении появляются ионы с $q \neq q_0$, и ширина распределения ионов по зарядам возрастает (рис. 3). При толщине мишени $T \sim 4.0$ мкм отличие параметра $D(E, x)$ от равно-

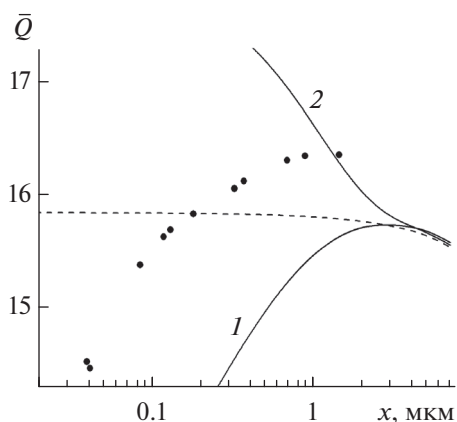


Рис. 2. Зависимость среднего заряда $\bar{Q}(E, x)$ ионов аргона ($Z = 18$) с энергией $E_0 = 4.3$ МэВ/нуклон от толщины углеродной мишени x и начального заряда ионов q_0 : 1 – 8; 2 – 18. Сплошными линиями показаны результаты расчета $\bar{Q}(E, x)$, пунктирной линией обозначены результаты расчета среднего равновесного заряда $\bar{q}(E)$, точками – данные [25], полученные на основе экспериментальных зарядовых фракций ионов Ar^{8+} .

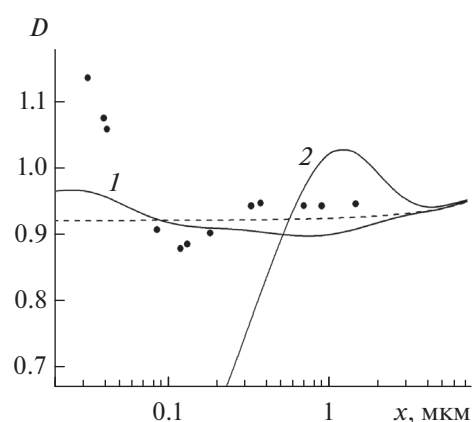


Рис. 3. Зависимость параметра ширины зарядового распределения $D(E, x)$ ионов аргона ($Z = 18$) с энергией $E_0 = 4.3$ МэВ/нуклон от толщины углеродной мишени x и начального заряда q_0 : 1 – 8; 2 – 18. Сплошными линиями обозначены результаты расчета $D(E, x)$, пунктирной линией показаны результаты расчета ширины равновесного распределения по зарядам $d(E)$, точками – данные [25], полученные на основе экспериментальных зарядовых фракций ионов Ar^{8+} .

весного значения $d(E)$ не превышает 3%. Отметим, что для ионов с $\bar{q}(E)$ существует область значений x , в которой $D(E, x) > d(E)$. В этом качественное отличие описываемого процесса от процесса установления равновесного зарядового распределения для ионов с $q_0 < \bar{q}(E_0)$ (рис. 3). При толщине мишени $x \geq T$, где $T = 4$ мкм, зарядовое распределение ионов Ar^{q_0+} становится равновесным, и его ширина не зависит от начального заряда ионов q_0 . В этом случае параметры равновесного зарядового распределения $\bar{q}(E)$ и $d(E)$ меняются за счет изменения сечений перезарядки при уменьшении энергии ионов E .

Средняя энергия ионов уменьшается с увеличением толщины мишени по линейному закону (рис. 4). Это объясняется слабой зависимостью неупругих потерь энергии $S_q(E_0, Z, Z_t, x)$ (33) от толщины мишени x и тем, что неупругие потери энергии в процессах потери $S_{q+1}(E_0, Z, Z_t)$ и захвата $S_{q-1}(E_0, Z, Z_t)$ одного электрона не зависят от x . В поверхностных слоях мишени, в которых зарядовое распределение ионов неравновесное, результаты расчета, полученные новым методом, значительно отличаются от результатов, вычисленных методом Монте-Карло. Такое несоответствие можно объяснить зависимостью потерь энергии от заряда иона в поверхностных слоях мишени, где распределение ионов по зарядам неравновесное (рис. 2 и 3). Подобные особенности не учитываются программой SRIM, в которой все ионы имеют одинаковый заряд. В этом отноше-

нии новая модель описывает зарядовое и энергетическое распределение ионов в поверхностных слоях мишени точнее. Результаты расчетов методом на основе процессов Маркова показывают, что средняя энергия ионов зависит от начального заряда ионов q_0 . Чем больше начальный заряд иона, тем больше его потери энергии и меньше средняя энергия. Когда устанавливается равновесное зарядовое распределение ($x = 3.5\text{--}4$ мкм), различие значений средней энергии для разных q_0 сохраняется, что связано с отсутствием для $\bar{E}(x)$ соотношений, аналогичных (19). При большой толщине мишени, когда зарядовое распределение ионов равновесное, изменение среднего заряда $\bar{q}(E)$ остается в пределах погрешности δ (19) (рис. 2), причем различие значений средней энергии ионов с разными q_0 продолжает увеличиваться. Это связано с разницей в значениях энергии ионов на момент установления равновесного зарядового распределения и тем, что в области энергии, в которой $\bar{E}(x)$ больше энергии, соответствующей максимуму неупругих потерь энергии ионов, потери энергии возрастают при замедлении иона. Следовательно, при быстрых столкновениях чем меньше скорость иона тем больше он теряет энергию и тем больше становятся различия средней энергии ионов Ar^{8+} и Ar^{18+} (рис. 4). Эти отличия средней энергии ионов $\bar{E}(x)$ приводят к изменению $\bar{q}(E)$ и зарядового распределения ионов. Таким образом, распределение ионов по зарядам и энергии при толщине мишени x ,

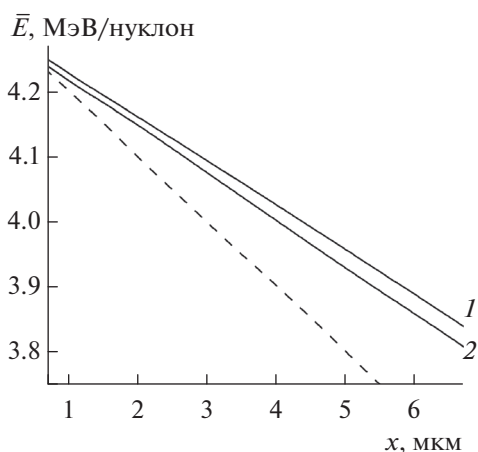


Рис. 4. Зависимость средней энергии $\bar{E}(x)$ ионов аргона ($Z = 18$) с энергией $E_0 = 4.3$ МэВ/нуклон от толщины x углеродной мишени и начального заряда q_0 : 1 — 8; 2 — 18. Сплошными линиями обозначены результаты расчета $\bar{E}(x)$, пунктирной линией показаны результаты расчета [9] методом Монте-Карло для ионов с равновесным зарядовым распределением.

кроме E_0 и q_0 , зависит также от изменения зарядово-энергетического распределения ионов в поверхностных слоях мишени и от того, каким это распределение сформировалось к моменту установления зарядового равновесия.

Разброс значений $\Delta(x)$ средней энергии ионов аргона с энергией $E_0 = 4.3$ МэВ/нуклон за счет изменения их зарядово-энергетического распределения был вычислен на основе модели марковских процессов и методом Монте-Карло по программе SRIM. Результаты расчетов показывают, что $\Delta(x)$ в модели марковских процессов составляет от 10 до 40 кэВ и слабо зависит от толщины углеродной мишени x и начального заряда q_0 . Это в 5–20 раз меньше значений, полученных при моделировании методом Монте-Карло [9]. Объясняются такие большие различия тем, что предложенный метод описывает разброс значений средней энергии ионов $\Delta(x)$ за счет корреляций нескольких неупругих процессов с разными величинами сечений и потерь энергии. Это не единственная причина, которая может приводить к разбросу значений средней энергии ионов [26]. Энергия, теряемая ионом в одном столкновении с атомом мишени, зависит от угла рассеяния. Учет влияния усреднения по углу рассеяния иона на величину $\Delta(x)$ является наиболее перспективным направлением дальнейшего развития модели, предложенной в настоящей работе.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена теоретическая модель, описывающая эволюцию зарядово-энергетического распределения ионов, проходящих через мишень, как процесс Маркова, в котором вероятность переходов между элементами фазового пространства пропорциональна сечениям неупругих столкновений и неупругим потерям энергии ионов. Учет корреляций процессов перезарядки ионов и ионизации атомов мишени позволил описать влияние энергетического распределения ионов не только на процесс установления равновесного зарядового распределения, но и на изменение средней энергии ионов, когда распределение по зарядам неравновесное.

Новая модель уточняет параметры ионов, прошедших через среду. В случае поверхностных слоев мишени зарядовое распределение ионов зависит от начального заряда ионов q_0 . При толщине мишени $x = T$ (19) устанавливается равновесное распределение ионов по зарядам. Зарядовое распределение ионов в области $x > T$ изменяется в соответствии с зависимостью равновесных параметров $\bar{q}(E)$, $d(E)$ от энергии, связанной с замедлением ионов в среде. Отличие вычисленной средней энергии ионов $\bar{E}(x)$ от значений, полученных методом Монте-Карло [9], объясняется уточнением эволюции зарядово-энергетического распределения ионов в поверхностных слоях мишени, где распределение ионов по зарядам неравновесное. Разброс значений средней энергии ионов $\Delta(x)$ связан с учетом корреляций сечений, соответствующих разным неупругим процессам.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cowern N.E.B., Read P.M., Sofield C.J. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1985. V. 12. P. 43.
2. Ogawa H., Katayama I., Ikegami H. et al. // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 11370.
3. Ogawa H., Katayama I., Sugai I. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1993. V. 82. P. 80.
4. Frey C.M., Dollinger G., Bergmaier A. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1996. V. 107. P. 31.
5. Blazevic A., Bohlen H.G., Oertzen W. // Phys. Rev. A. 2000. V. 61. P. 032901.
6. Blazevic A., Bohlen H.G., Oertzen W. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2002. V. 190. P. 64.
7. Ogawa H., Katayama I., Haruyama Y. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2002. V. 195. P. 175.
8. Sigmund P., Schinner A. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2016. V. 384. P. 30. <https://doi.org/doi.10.1016/j.nimb.2016.07.016>.
9. Ziegler J.F. SRIM: the Stopping and Range of Ions in Matter (www.srim.org).
10. Sigmund P., Schinner A. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2002. V. 195. P. 64.

11. Grande P.L., Schiwietz G. // Adv. Quantum Chemi. 2004. V. 45. P. 7. doi 10.1016/S065-3276(04)45002-3
12. Rozet J.P., Stephan C., Vernhet D. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1996. V. 107 P. 67.
13. Белкова Ю.А., Новиков Н.В., Теплова Я.А. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2018. № 8. С. 38. doi 10.1134/S1027451018040262.
14. Allison S.K. // Rev. Mod. Phys. 1958. V. 30. P. 1137.
15. Belkova Yu.A., Novikov N.V., Teplova Ya.A. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2016. V. 373. P. 35. <http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2016.02.044>.
16. Novikov N.V., Teplova Ya.A. // J. Phys. Conf. 2009. V. 194. P. 082032. doi 10.1088/1742-6596/194/8/082032
17. Dmitriev I.S., Teplova Ya.A., Belkova Yu.A. et al. // At. Data Nucl. Data Tables. 2010. V. 96. P. 85. doi 10.1016/j.adt.2009.09.003
18. Новиков Н.В., Теплова Я.А., Файнберг Ю.А. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2013. № 3. С. 35. doi 10.7868/S0207352813030177
19. Novikov N.V., Teplova Ya.A. // Phys. Lett. A. 2014. V. 378 P. 1286. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2014.03.004>.
20. Schiwietz G., Grande P.L. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2001. V. 175–177. P. 125.
21. Belkova Yu.A., Novikov N.V., Teplova Ya.A. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2015. V. 343. P. 110. doi 10.1016/j.nimb.2014.11.016
22. Novikov N.V., Teplova Ya.A. // Phys. Lett. A. 2013. V. 377. P. 463. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2012.12.019>.
23. Rudd M.E., DuBois R.D., Toburen L.H. et al. // Phys. Rev. A. 1983. V. 38. P. 3244.
24. Белкова Ю.А., Новиков Н.В., Теплова Я.А. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2018. № 6. С. 13. doi 10.1134/S1027451018030242
25. Miyoshi T., Noda K., Sato H. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2006. V. 251. P. 79. doi 10.1016/j.nimb.2006.06.017
26. Sigmund P. Particle Penetration and Radiation Effects. V. 2: Penetration of Atomic and Molecular Ions. Springer, 2014. 617 p.

Description of the Charge-Energy Distribution of Fast Ions

N. V. Novikov, Ya. A. Teplova

A theoretical model describing the evolution of the charge-energy distribution of ions passing through the matter as a Markov process in which the probability of transitions between the elements of the phase space is proportional to the inelastic collision cross sections and inelastic energy losses is proposed. Taking into account the correlations between the ion charge exchange and the ionization of target atoms makes it possible to describe not only the effect of the ion energy distribution on the process of establishing the equilibrium charge distribution, but also on the change in the mean energy of ions with a nonequilibrium charge distribution.

Keywords: mean charge, width of the charge distribution of ions, inelastic energy losses of ions, mean ion energy.